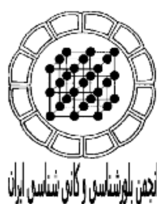
مجله
بلورشناسی و کانی شناسی ایران

سال بیست و هفتم، شمارهٔ چهارم، زمستان ۹۸، از صفحهٔ ۹۵۹ تا ۹۶۶



بررسی برهم‌کنش‌های بین مولکولی در ساختار بلوری ۱-فنیل-۱و۲-اتان‌دی‌اُل

رحمان بیکس*[۱]، مرضیه السادات امامی[۲]، آننا کوزاکییویچ[۳]

۱- گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه بین‌المللی امام خمینی، قزوین، ایران

۲- گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران

۳- گروه بلورشیمی و بیوبلورشناسی، دانشکده شیمی، دانشگاه نیکلاس کوپرنیک، ۸۷-۱۰۰ تورون، لهستان

(دریافت مقاله: ۹۷/۱۱/۲۸، نسخه نهایی: ۹۸/۲/۱۶)

چکیده: ترکیب ۱-فنیل-۱ و ۲-اتان‌دی‌اُل از واکنش آب کافت اپوکسی‌استایرن در محیط آبی تهیه شد. ترکیب مورد نظر با استفاده از طیف‌سنجی تبدیل فوریه فروسرخ (FT-IR) و تشدید مغناطیسی هسته (NMR) شناسایی شد و ساختار بلوری آن به روش پراش پرتو ایکس تعیین شد. اطلاعات بلورشناسی این ترکیب در دمای ۲۹۳ کلوین جمع آوری شدند. این ترکیب در سیستم بلوری سه میل و گروه فضایی $P\bar{1}$ متبلور شده است. پارامترهای یاخته یکه آن عبارتند از α = ۱۱۷٫۵۸۴(۱۴)°، β = ۹۹٫۳۲۲(۱۳)°، γ = ۹۰٫۰۴۷(۱۴)°، c =۱۷٫۳۴۵(۲) Å، b =۱۶٫۲۰۴(۲) Å و a = ۶٫۰۲۷۴(۱۰) Å. واحد بی‌تقارن ساختار بلوری این ترکیب شامل چهار مولکول ۱-فنیل-۱ و ۲-اتان‌دی‌اُل است که از طریق برهم‌کنش‌های پیوند هیدروژنی قوی و برهم‌کنش‌های C-H⋯π باهم در ارتباط هستند. پیوندهای هیدروژنی بین مولکولی O-H⋯O و C-H⋯O در ساختار این ترکیب موجب ایجاد یک شبکه فرادره‌ای شده است.

واژه‌های کلیدی: *۱-فنیل-۱ و ۲-اتان‌دی‌اُل؛ ساختار بلوری؛ پیوندهای هیدروژنی؛ چندشکلی جدید.*

[DOR: 20.1001.1.17263689.1398.27.4.14.3]

مقدمه

دی‌اُل‌ها یا گلیکول‌ها ترکیبات شیمیایی هستند که دو گروه هیدروکسیل (OH) در ساختار مولکولی خود دارند. در میان آنها، ۱و۲-دی‌اُل‌ها از اهمیت ویژه‌ای برخوردار هستند، زیرا توانایی تبدیل شدن برخی مولکول‌های بسیار جالب را دارند و همچنین زیر مجموعه بسیاری از ترکیبات دارویی هستند [۱-۲]. ۱و۲-دی‌اُل‌ها در بیشتر مولکول‌های زیستی حضور دارند. کربوهیدرات‌ها و ترکیبات آنها (گلیکوپروتئین‌ها، ویتامین‌ها و نوکلئوتیدها)، استروئیدها مانند الکل‌های صفراوی، ماکرولیدها، اسپینگولاپیپدها و ترپنوئیدها همه شامل یک گروه گلیکولی هستند [۳، ۴]. این ترکیبات به دلیل توانایی بالا در تشکیل پیوند هیدروژنی قوی با سایر مولکول‌ها، ویژگی‌های بسیاری از خود نشان می‌دهند و از این جهت کاربردهای متنوعی در صنعت پیدا کرده‌اند. به عنوان مثال، اتیلن گلیکول (۱و۲-اتان دی‌اُل) که ساده‌ترین ترکیب این گروه است به عنوان ماده خام در تولید الیاف پلی استر و همچنین به عنوان افزودنی ضدجوش و ضدیخ در سیستم خنک کننده خودروها به کار می‌رود و ماده‌ای پرکاربرد در فرآیند یخ‌زدایی از سطوح هواپیماست [۵، ۶]. بدون شک، تشکیل پیوندهای هیدروژنی قوی بین گروه‌های OH آب و اتیلن گلیکول نقش مهمی در کاهش دمای انجماد و افزایش دمای جوش دارد. این امر بررسی برهم‌کنش‌های پیوند هیدروژنی در دی‌اُل‌ها را به یکی از موضوعات جذاب پژوهشی تبدیل کرده است. با این وجود، به دلیل مایع بودن بیشتر دی‌اُل‌های ساده و نداشتن تک بلور مناسب از آنها، برهم‌کنش‌های پیوند هیدروژنی در شبکه بلوری این دسته از ترکیبات در حالت بلوری به ندرت بررسی شده است.

واکنش باز شدن حلقه‌های اپوکسید یک فرایند بسیار مهم

*نویسنده مسئول، تلفن: ۰۲۸۳۳۹۰۱۳۶۸، نمابر: ۰۲۸۳۳۷۸۰۰۸۳، پست الکترونیکی: bikas@sci.ikiu.ac.ir

[DOI: 10.29252/ijcm.27.4.959]

در تحولات شیمی آلی است و در شیمی مواد دارویی و طبیعی کاربرد بسیاری دارد. باز شدن حلقه اپوکسید با واکنش‌گرهای مختلف یک راهکار راحت و بسیار کاربردی برای سنتز طبقات مهم واسطه‌ها در شیمی آلی است. باز شدن حلقه اپوکسید با آب در حضور کاتالیزورهای مختلف باعث تولید ۱و۲-دی‌اُل‌ها می‌شود [۷-۹]. ۱-فنیل-۱و۲-اتان‌دی‌اُل که استایرن گلیکول نیز نامیده می‌شود یک دی‌اُل شامل حلقه معطر فنیل است که می‌توان آن را از واکنش باز شدن حلقه اپوکسید در محیط آبی از پیش ماده استایرن اپوکسید ترکیب تهیه کرد. این ماده می‌تواند یکی از مواد مهم در بررسی برهم‌کنش‌های بین مولکولی ۱و۲-دی‌اُل‌ها باشد. با این‌حال، بررسی مراجع علمی و مرکز داده‌های بلورشناسی کمبریج (CCDC) نشان می‌دهد که پژوهشی پیرامون برهم‌کنش‌های بین مولکولی در ساختار این ماده انجام نشده است. ساختار بلوری این ماده در سال ۲۰۰۴ توسط ردر و ویکت (با کد ساختاری YAJQUW، شماره CCDC ۲۵۷۸۱۴ و پارامترهای یاخته یکه γ = ۷۹٫۸۶(۰)°، β = ۷۹٫۸۶(۰)°، α = ۸۹٫۵۶(۰)°، c = ۱۵٫۲۹۶(۱) Å، b = ۷٫۹۱۵(۰)Å، a = ۵٫۹۸۴(۰) Å) و در سال ۲۰۰۶ توسط Nieger (با کد ساختاری YAJQUW01، شماره CCDC ۶۱۲۰۱۱ و پارامترهای یاخته یکه γ = ۸۹٫۵۹(۰)°، β = ۷۹٫۷۵(۰)°، α = ۸۹٫۶۱(۰)°، c = ۱۵٫۲۹۷(۳) Å، b = ۷٫۹۳۸(۱) Å، a = ۵٫۹۸۷(۱) Å) به صورت فایل گزارش شخصی[1] به مرکز CCDC ارسال شده و گزارش دیگری در این رابطه به چاپ نرسیده است. در هر دو گزارش، ترکیب در شبکه بلوری سه میل و گروه فضایی $P\bar{1}$ متبلور شده است. در این پژوهش، داده‌های بلورشناسی نشان می‌دهند که ترکیب ۱-فنیل-۱و۲-اتان‌دی‌اُل می‌تواند در شبکه بلوری سه میل با پارامترهای یاخته یکه متفاوتی نیز متبلور شود که تا به حال برای آن گزارش نشده است. با توجه به اهمیت برهم‌کنش‌های بین‌مولکولی در بررسی‌های بلورشناسی [۱۰-۱۷] و در بررسی برهم‌کنش بین مواد مختلف در سیستم‌های زیستی و مواد دارویی [۱۸، ۱۹]، برهم‌کنش‌های بین‌مولکولی در شبکه بلوری این ترکیب بررسی می‌شود.

روش تجربی

همه مواد مورد نیاز با خلوص تجزیه‌ای از شرکت مرک خریداری شده و بدون هیچ گونه خالص‌سازی مورد استفاده قرار گرفتند. از پلیمر کوئوردیناسیونی مس (II)-هیدرازون به عنوان کاتالیزور مس (II) استفاده شد که این ترکیب با استفاده از روش گزارش شده پیشین تهیه گردید [۲۰]. طیف تبدیل فوریه فرو سرخ (FT-IR) ترکیب پس از خالص‌سازی و تهیه قرص KBr با استفاده از دستگاه Thermo مدل IS10 و Bruker در ناحیه ۴۰۰ تا ۴۰۰۰ cm^{-1} ثبت شد. طیف تشدید مغناطیسی هسته پروتون (1H NMR) ترکیب با استفاده از دستگاه Bruker Avance، 250 MHz در حلال $CDCl_3$، گرفته شد. تجزیه عنصری ترکیب با استفاده از دستگاه Perkin Elmer 2400 انجام شد. داده‌های پراش پرتو X تک بلور توسط دستگاه پراش سنج Oxford Sapphire CCD با پرتو αK مولیبدن در دمای ۲۹۳ کلوین جمع آوری شد. ساختار بلوری ترکیب از روش مستقیم تعیین و اصلاح نتایج به روش حداقل مربعات ماتریس کامل بر پایه F^2 با نرام افزار SHELX-2015 انجام شد [۲۱]. برای تهیه تصاویر از نرم افزار دیاموند استفاده شده است [۲۲].

فایل اطلاعات بلورشناسی (CIF) در مرکز داده‌های بلورشناسی کمبریج (CCDC) با شماره CCDC 1856838 به ثبت رسیده و از وبگاه www.ccdc.cam.ac.uk/conts/retrieving.html به طور رایگان قابل دریافت است.

تهیه فنیل-۱و۲-اتان‌دی‌اُل

۱٫۱۴ میلی لیتر استایرن‌اکسید (۱۰ میلی‌مول) به ۱۰ میلی لیتر آب مقطر اضافه شد. سپس به محلول به دست آمده مقدار ۰٫۰۰۲ گرم کاتالیزور مس (II) اضافه گردید. مخلوط واکنش به مدت یک ساعت در دمای محیط به هم زده شد. سپس فاز آلی از طریق استخراج با اتیل استات (با ۱۰ میلی‌لیتر و ۳ مرتبه) جداسازی شد. تک بلورهای ماده حاصل از واکنش، با روش تبخیر آهسته حلال در دمای محیط در مدت یک روز به دست آمدند. بلورهای سفید صفحه‌ای از محلول جدا شده و برای شناسایی و تعیین ساختار بلوری به وسیله پراش پرتو ایکس بررسی شدند.

بحث و بررسی

بررسی داده‌های طیف‌سنجی

ترکیب مورد نظر با روش‌های طیف‌سنجی FT-IR و تشدید مغناطیسی هسته (NMR) شناسایی شد. در طیف FT-IR ترکیب، نوار جذبی پهن ظاهر شده در ۳۲۰۰ cm^{-1} مربوط به گروه‌های هیدروکسیل است. نوارهای جذبی مربوط به C-H حلقوی و زنجیری به ترتیب در ناحیه ۳۰۶۰ cm^{-1} و

1- CSD Communication (Private Communication)

cm^{-1} ۲۹۳۲ ظاهر شده‌اند. نوارهای پر شدت در گستره‌ی cm^{-1} ۱۴۹۳ تا cm^{-1} ۱۴۶۹ ناشی از ارتعاشات کششی C=C حلقه معطر است. ارتعاشات خمشی خارج از صفحه‌ی حلقه فنیل نیز در گستره cm^{-1} ۶۹۹ تا cm^{-1} ۸۹۷ ظاهر شده‌اند. ترکیب بدست آمده با استفاده از تجزیه عنصری نیز بررسی شد. درصدهای تجزیه عنصری ترکیب ($C_8H_{10}O_2$) شامل ۶۹٫۵۴٪ (کربن)، ۷٫۳۰٪ (هیدروژن) و ۲۳٫۱۶٪ (اکسیژن) بودند. درصدهای محاسبه شده فراورده برابر با ۶۸٫۹۵٪ (کربن)، ۷٫۰۲٪ (هیدروژن) و ۲۳٫۲۶٪ (اکسیژن) است. چنان که دیده می‌شود، همخوانی خوبی بین داده‌های تجربی و محاسبه شده وجود دارد. سیگنال‌های ظاهر شده در طیف ^{1}H NMR این ترکیب بر حسب ppm در حلال کلروفرم دوتره عبارت بودند از (m,7H,aromatic) ۷٫۲۹-۷٫۴۴، (m,CH_2) ۴٫۸۱-۴٫۸۶ و (m, CH) ۳٫۶۳-۳٫۸۰.

بررسی داده‌های پراش‌سنجی

بلورهای سفید ترکیب ۱-فنیل-۱و۲-اتان‌دی‌اُل با استفاده از پراش پرتو ایکس در دمای ۲۹۳ کلوین تعیین ساختار شدند. یاخته یکه، داده‌های بلورشناسی و برخی از طول پیوندها و زوایای پیوندی به ترتیب در جدول‌های ۱ و ۲ آورده شده است. ساختار بلوری ترکیب نیز در شکل ۱ الف نمایش داده شده است. بررسی ساختار بلوری این ماده نشان می‌دهد که ترکیب در سیستم بلوری سه میل و گروه فضایی $P\bar{1}$ متبلور شده است. در واحد بی‌تقارن این ترکیب چهار مولکول وجود دارد و هشت مولکول نیز در شبکه یاخته یکه آن متبلور شده است. با اینکه طول‌ها و زوایای پیوندی در این چهار مولکول به هم بسیار نزدیک هستند، تفاوت اندکی در مقادیر آنها وجود دارد. بنابراین، این مولکول‌ها با نام‌های A، B، C، و D شماره‌گذاری شده‌اند و شماره اتم‌ها در آنها یکسان شماره‌گذاری شده‌اند.

جدول ۱ داده‌های بلورشناسی ۱-فنیل-۱و۲-اتان‌دی‌اُل و مقایسه آنها با گزارش‌های پیشین در مرکز داده‌های بلورشناسی کمبریج.

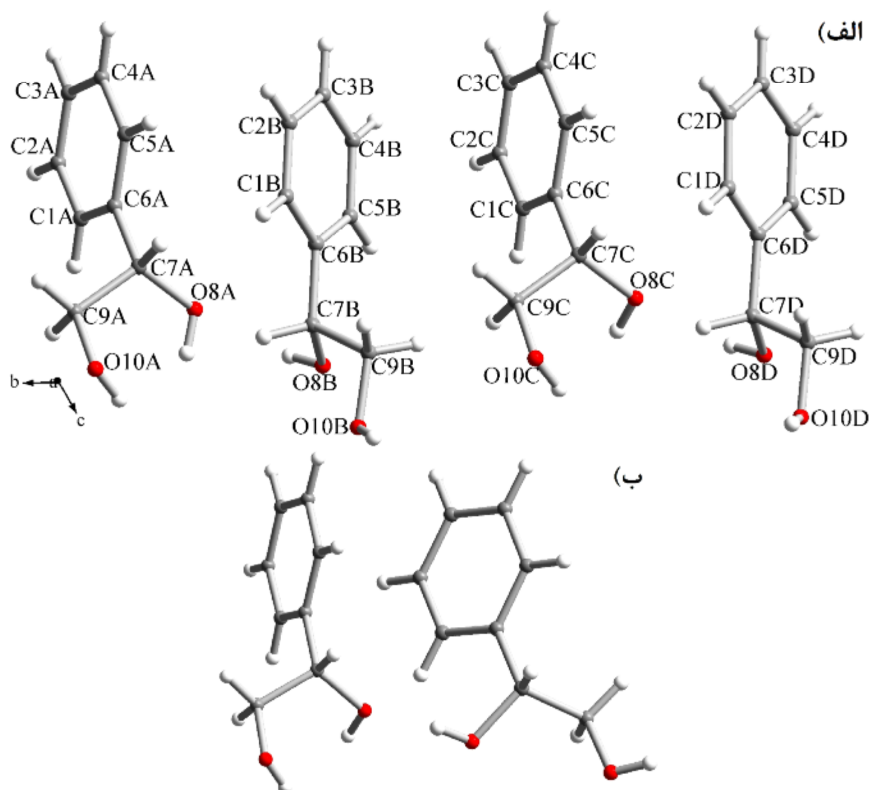
۱-فنیل-۱و۲-اتان‌دی‌اُل	گزارش حاضر شماره CCDC ۱۸۵۶۸۳۸	YAJQUW شماره CCDC ۲۵۷۸۱۴	YAJQUW01 شماره CCDC ۶۱۲۰۱۱
فرمول مولکولی	$C_8H_{10}O_2$	$(C_8H_{10}O_2)_2$	$C_8H_{10}O_2$
وزن مولکولی (گرم بر مول)	۱۳۸٫۱۶	۲۷۶٫۳۲	۱۳۸٫۱۶
اندازه بلور (میلی‌متر مکعب)	۰٫۰۹ ×۰٫۱۸×۰٫۲۹	۰٫۷۰ ×۰٫۱۷×۰٫۱۲	۰٫۲۵ ×۰٫۱۵×۰٫۰۵
شکل و رنگ بلور	صفحه‌ای، بی‌رنگ	سوزنی، بی‌رنگ	صفحه‌ای، بی‌رنگ
سیستم بلوری	سه میل	سه میل	سه میل
گروه فضایی	$P\bar{1}$	$P\bar{1}$	$P\bar{1}$
a (Å)	۶٫۰۲۷۴(۱۰)	۵٫۹۸۷۴(۱۳)	۵٫۹۸۳۷(۴)
b (Å)	۱۶٫۲۰۴(۲)	۷٫۹۳۷۵(۱۸)	۷٫۹۱۵۲(۷)
c (Å)	۱۳٫۳۴۵(۲)	۱۵٫۲۹۷(۳)	۱۵٫۲۹۶۵(۱۳)
α (°)	۱۱۷٫۵۸۴(۱۴)	۸۹٫۶۱۳(۴)	۸۹٫۵۵۷(۳)
β (°)	۹۹٫۳۲۲(۱۳)	۷۹٫۷۵۲(۴)	۷۹٫۸۶۴(۴)
γ (°)	۹۰٫۰۴۷(۱۴)	۸۹٫۵۹۳(۴)	۸۹٫۴۱۴(۵)
حجم یاخته یکه($Å^3$)	۱۴۷۶٫۱(۴)	۷۱۵٫۴(۳)	۷۱۳٫۱۲(۱۰)
تعداد مولکول در یاخته	۸	۲	۴
چگالی(g/cm^3)	۱٫۲۴۳	۱٫۲۸۳	۱٫۲۸۷
دما (کلوین)	۲۹۳	۱۵۳	۱۲۳
مقادیر h, k, l	h = -۶→۶, k = -۱۸→۱۷, l = -۱۸→۱۹	h = -۷→۷, k = - ۱۰→۱۰, l = -۱۹→۱۹	h = -۶→۷, k= -۷→۹, l = -۱۸→۱۸
ضریب جذب	۰٫۰۹	۰٫۰۹	۰٫۰۹
$F(000)$	۵۹۲	۲۹۶	۲۹۶
گستره θ برای جمع آوری داده‌ها	۲٫۴-۲۳٫۴	۲٫۶-۲۷٫۵	۱-۲۵
$R[F^2 > 2\sigma(F^2)]$	۰٫۰۶۲	۰٫۰۵۵	۰٫۰۳۹
$wR(F^2)$	۰٫۲۳۸	۰٫۱۶۱	۰٫۰۸۱
R_{int}	۰٫۰۵۷	۰٫۰۴۲	۰٫۰۴۱
تعداد پارامتر	۳۶۴	۱۸۵	۱۹۳
مجموع بازتاب‌های کل	۷۴۰۶	۸۳۷۸	۴۹۱۷

[DOR: 20.1001.1.17263689.1398.27.4.14.3]

[DOI: 10.29252/ijcm.27.4.959]

جدول۲ برخی از طول‌ها (بر حسب Å) و زوایای پیوندی (برحسب درجه) در شبکه بلوری ترکیب ۱-فنیل-۱و۲-اتان‌دی‌اُل

پیوند	طول در مولکول A	طول در مولکول B	طول در مولکول C	طول در مولکول D
C1—C2	۱/۳۵۴(۱۱)	۱/۳۶۹(۱۰)	۱/۳۵۹(۱۰)	۱/۳۷۱(۹)
C1—C6	۱/۴۰۴(۱۰)	۱/۳۸۵(۹)	۱/۳۷۷(۱۱)	۱/۳۷۷(۱۰)
C2—C3	۱/۳۵۵(۱۱)	۱/۳۵۳(۱۱)	۱/۳۵۷(۱۰)	۱/۳۷۶(۱۲)
C3—C4	۱/۳۶۵(۱۲)	۱/۳۵۸(۱۱)	۱/۳۶۴(۱۲)	۱/۳۸۵(۱۰)
C4—C5	۱/۳۸۲(۱۲)	۱/۳۹۹(۹)	۱/۳۷۸(۱۲)	۱/۳۶۲(۹)
C5—C6	۱/۳۷۷(۹)	۱/۳۹۶(۹)	۱/۳۸۹(۹)	۱/۳۹۰(۱۰)
C6—C7	۱/۵۰۱(۱۰)	۱/۵۰۶(۹)	۱/۵۰۴(۱۰)	۱/۵۱۷(۹)
C7—O8	۱/۴۴۱(۸)	۱/۴۳۶(۸)	۱/۴۳۰(۸)	۱/۴۱۹(۸)
C7—C9	۱/۴۹۵(۹)	۱/۵۱۳(۱۰)	۱/۴۸۹(۸)	۱/۴۹۸(۱۰)
C9—O10	۱/۴۲۲(۸)	۱/۴۱۵(۸)	۱/۴۲۶(۸)	۱/۴۰۸(۷)
پیوند	**زاویه در مولکول A**	**زاویه در مولکول B**	**زاویه در مولکول C**	**زاویه در مولکول D**
C2—C1—C6	۱۲۲/۰(۸)	۱۲۰/۴(۸)	۱۲۱/۱(۸)	۱۲۲/۲(۸)
C3—C2—C1	۱۲۰/۵(۹)	۱۲۱/۰(۸)	۱۱۹/۹(۹)	۱۱۹/۸(۹)
C2—C3—C4	۱۲۰/۳(۱۰)	۱۱۹/۸(۸)	۱۲۱/۲(۱۰)	۱۱۹/۲(۸)
C3—C4—C5	۱۱۸/۹(۹)	۱۲۱/۴(۹)	۱۱۸/۸(۹)	۱۱۹/۷(۹)
C6—C5—C4	۱۲۲/۶(۹)	۱۱۸/۲(۷)	۱۲۰/۹(۹)	۱۲۲/۴(۸)
C5—C6—C1	۱۱۵/۵(۸)	۱۱۹/۲(۷)	۱۱۷/۹(۸)	۱۱۶/۷(۷)
C5—C6—C7	۱۲۱/۷(۷)	۱۲۰/۶(۷)	۱۲۱/۴(۷)	۱۱۹/۵(۷)
C1—C6—C7	۱۲۲/۷(۷)	۱۲۰/۲(۷)	۱۲۰/۷(۸)	۱۲۳/۹(۷)
O8—C7—C9	۱۱۱/۹(۶)	۱۱۲/۱(۶)	۱۱۱/۵(۶)	۱۰۷/۴(۶)
O8—C7—C6	۱۱۱/۱(۶)	۱۰۶/۷(۶)	۱۱۲/۲(۷)	۱۱۱/۱(۶)
C9—C7—C6	۱۱۰/۴(۶)	۱۱۲/۸(۶)	۱۱۱/۶(۶)	۱۱۱/۳(۶)
O10—C9—C7	۱۱۲/۳(۶)	۱۰۹/۵(۶)	۱۱۳/۶(۷)	۱۱۱/۴(۶)



شکل ۱ الف) ساختار بلوری ترکیب۱-فنیل-۱و۲-اتان‌دی‌اُل و ب) شکل دو مولکول راست‌گرد و چپ‌گرد ۱-فنیل-۱و۲-اتان‌دی‌اُل کـه همزمـان در شبکه بلوری ترکیب متبلور شده‌اند.

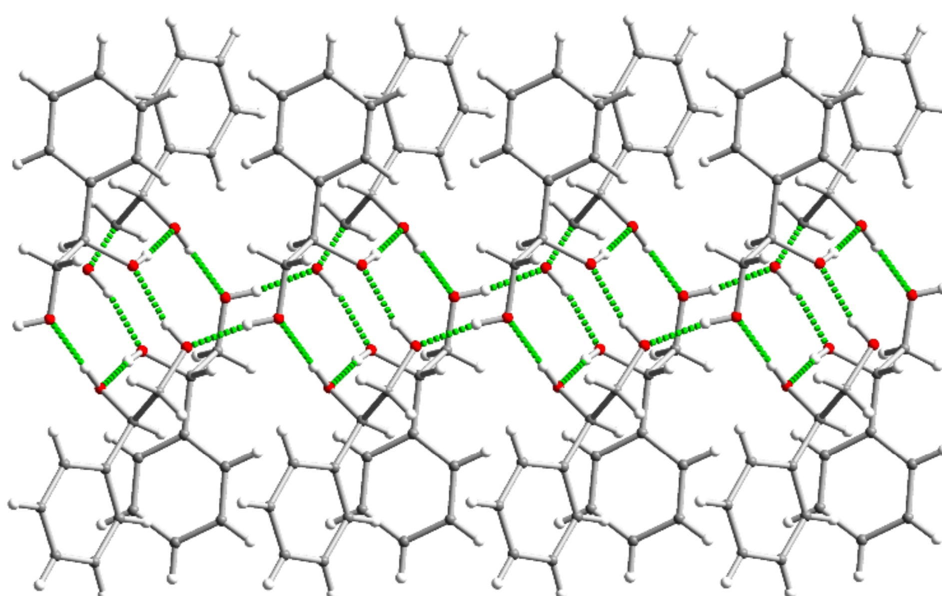
[DOR: 20.1001.1.17263689.1398.27.4.14.3]
[DOI: 10.29252/ijcm.27.4.959]

بررسی ساختار ترکیب نشان می‌دهد که بلور دربردارنده مخلوط راسمیک این ماده است و هر دو ایزومر راست‌گرد و چپ‌گرد همزمان در شبکه بلوری متبلور شده‌اند که ساختار آنها در شکل ۱-ب مقایسه شده است. چنان که انتظار می‌رود، به دلیل وجود دو گروه هیدروکسیل در ساختار ترکیب، پیوندهای هیدروژنی بسیار قوی و جهت یافته در شبکه بلوری بین گروه‌های OH یک مولکول با اکسیژن گروه هیدروکسیل از مولکول مجاور (O-H···O) وجود دارد که این پیوندهای هیدروژنی باعث تشکیل یک زنجیر پلیمری شده‌اند. داده‌های مربوط به برهم‌کنش‌های پیوند هیدروژنی ترکیب در جدول ۳ آورده شده است. زنجیر پلیمری بدست آمده از برهم‌کنش‌های پیوند هیدروژنی O-H···O در شکل ۲ نشان داده شده است. این زنجیر از واحدهای تکرار شونده شامل دو مولکول با پیکربندی راست‌گرد و دو مولکول با پیکربندی چپ‌گرد ایجاد شده است.

جدول ۳ اطلاعات پیوندهای هیدروژنی بین مولکولی در ساختار بلوری ۱-فنیل-۱و۲-اتان‌دی‌اُل

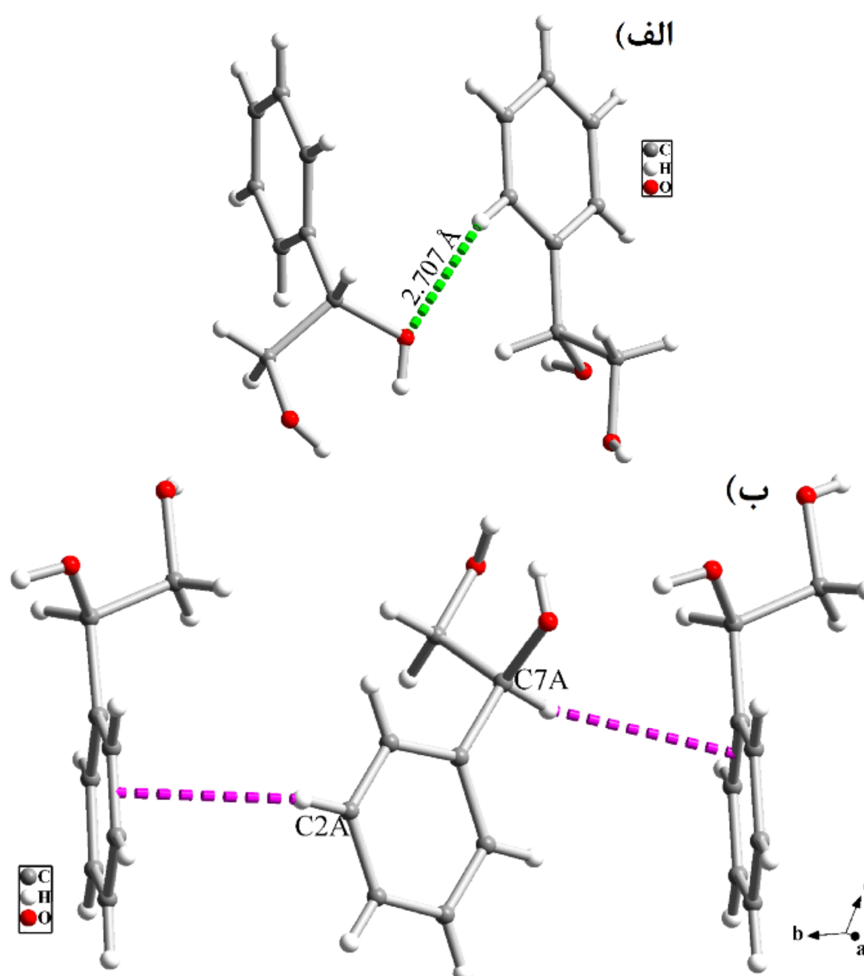
D—H···*A*	*D*—H (Å)	H···*A* (Å)	*D*···*A* (Å)	*D*—H···*A* (Å)
O8*A*—H8*AA*···O10*A*	۰/۸۲	۲/۴۸	۲/۸۷۵(۷)	۱۱۱
O8*A*—H8*AA*···O8*B*^{i}	۰/۸۲	۲/۴۷	۳/۲۷۹(۶)	۱۶۹
O8*A*—H8*AA*···O10*B*^{i}	۰/۸۲	۲/۱۹	۲/۶۸۰(۶)	۱۱۹
O10*A*—H10*A*···O8*B*^{i}	۰/۸۲	۱/۸۸	۲/۶۹۰(۷)	۱۶۹
O8*B*—H8*BA*···O8*A*^{ii}	۰/۸۲	۱/۹۰	۲/۷۱۷(۷)	۱۷۸
O10*B*—H10*B*···O10*A*^{iii}	۰/۸۲	۱/۸۷	۲/۶۷۵(۷)	۱۶۵
O8*C*—H8*CA*···O10*D*^{iv}	۰/۸۲	۱/۹۰	۲/۷۲۴(۶)	۱۷۹
O10*C*—H10*C*···O8*D*^{iv}	۰/۸۲	۱/۸۸	۲/۶۸۵(۷)	۱۶۸
O8*D*—H8*DA*···O8*C*^{ii}	۰/۸۲	۱/۸۹	۲/۷۱۰(۷)	۱۷۶
O10*D*—H10*D*···O10*C*^{v}	۰/۸۲	۱/۹۲	۲/۶۶۸(۷)	۱۵۰

کدهای تقارنی: (i) $-x+1, -y+2, -z+1$; (ii) $x-1, y, z$; (iii) $-x+2, -y+2, -z+1$; (iv) $-x+1, -y+1, -z+1$; (v) $-x+2, -y+1, -z+1$.



شکل ۲ برهم‌کنش‌های هیدروژنی O-H…O و زنجیر پلیمری یک‌بعدی برآمده از آن در شبکه بلوری ۱-فنیل-۱و۲-اتان‌دی‌اُل

افزون بر این، برهم‌کنش پیوند هیدروژنی C-H···O نیز در شبکه بلوری این ترکیب دیده می‌شود که در شکل ۳-الف نشان داده شده است. این برهم‌کنش باعث ایجاد ساختار پلیمری دو بعدی در شبکه بلوری این ترکیب شده است. برهم‌کنش‌های π···π و C-H···π نقش بسیار مهمی در پایداری شبکه بلوری ترکیبات دربردارنده حلقه‌های فنیل ایفا می‌کنند [۲۳-۲۵]. به دلیل وجود حلقه فنیل، برهم‌کنش‌های π موجود در شبکه بلوری ترکیب نیز بررسی شدند. در شبکه بلوری این ترکیب، دو برهم‌کنش C-H···π قابل ملاحظه دیده می‌شود که مشخصه-های آنها در جدول ۴ و تصویرشان در شکل ۳-ب آورده شده است. در این ترکیب، برهم‌کنش‌های π···π بین حلقه‌های فنیل به دلیل فاصله نسبتاً زیاد بین حلقه‌ها و چگونگی قرارگیری آنها در فضا نسبت به هم، از برهم‌کنش‌های π···π بسیار ضعیف محسوب می‌شوند. مجموعه برهم‌کنش‌های بین مولکولی پیوند هیدروژنی و برهم‌کنش‌های π در این ترکیب نقش مهمی در پایداری ساختار بلوری ایفا می‌کنند. مقایسه شبکه بلوری این ترکیب با شبکه بلوری گزارش شده در مرکز داده‌های بلورشناسی کمبریج (جدول ۱) نشان می‌دهد که این ترکیب یک چندشکلی جدید است و پارامترهای یاخته یکه آن در مقایسه با گزارش‌های پیشین متفاوت و بزرگ‌تر است. افزون بر تفاوت در پارامترهای یاخته یکه، چهار مولکول از ترکیب در واحد بی‌تقارن این شبکه بلوری جدید وجود دارد در حالی‌که در گزارش‌های پیشین دو مولکول در واحد بی‌تقارن وجود دارد. با وجود تفاوت‌های قابل ملاحظه در این شبکه‌های بلوری، برهم‌کنش‌های پیوند هیدروژنی در آنها شباهت زیادی به هم دارند.



شکل ۳ الف) برهم‌کنش‌های هیدروژنی C-H···O و ب) نمایش برهم‌کنش‌های C-H···π در شبکه بلوری ۱-فنیل-۱و۲-اتان‌دی‌أل

جدول ۴ اطلاعات برهم‌کنش‌های C–H···π موجود در ساختار بلوری ۱-فنیل-۱و۲-اتان‌دی‌اُل

C—H··· π	H···π (Å)	C—H···π (°)	C···π (Å)
C2A—H2AA··· π(C4D−C5D)[i]	۲٫۹۴۵	۱۵۶٫۴	۳٫۸۱۵(۱۰)
C7A—H7A··· π(C1B−C6B)[ii]	۲٫۹۷۰	۱۵۲٫۸	۳٫۸۶۸(۱۲)

کدهای تقارنی: (i) *x, 1+y, z*; (ii) *1+x, y, z.*

برداشت

در این پژوهش، ترکیب ۱-فنیل-۱و۲-اتان‌دی‌اُل از طریق باز شدن حلقه اپوکسید از پیش ماده اپوکسی استایرن در محیط آبی تهیه شد. مقایسه داده‌های بلورشناسی ترکیب سنتز شده با ساختارهای گزارش شده پیشین نشان می‌دهد که این ترکیب در شبکه بلوری جدیدی متبلور شده و دارای داده‌های بلورشناسی متفاوتی است. بررسی‌های بلورشناسی نشان می‌دهد که مجموعه‌ای از پیوندهای هیدروژنی O-H···O و C-H···O و برهم‌کنش‌های C-H···π در شبکه بلوری این ترکیب وجود دارند که باعث ایجاد شبکه پلیمری می‌شوند و نقش مهمی در پایداری شبکه بلوری ترکیب دارند.

مراجع

[1] Wu X., Wang L., Wang S., Chen Y., "*Stereoselective introduction of two chiral centers by a single diketoreductase: An efficient biocatalytic route for the synthesis of statin side chains*", Amino Acids., 39 (2010) 305–308.

[2] Gonzalo D.G., "*Lipase Catalysed Kinetic Resolution of Racemic 1,2-Diols Containing a Chiral Quaternary Center*", Molecules., 23 (2018) 1585-1595.

[3] Zhou S., Drach J.C., Prichard M.N., Zemlicka J., "*(Z)- and (E)-2-(1,2-Dihydroxyethyl) methylenecyclopropane Analogues of 2'-Deoxyadenosine and 2'-Deoxyguanosine. Synthesis of All Stereoisomers, Absolute Configuration, and Antiviral Activity*", Journal of Medicinal Chemistry, 52 (2009) 3397–3407.

[4] Liu B., Yan J., Huang R., Wang W., Jin Z., Zanoni G., Zheng P., Yang S., Chi Y.R., "*Kinetic Resolution of 1,2-Diols via NHC-Catalyzed Site-Selective Esterification*", Organic Letters, 20 (2018) 3447−3450.

[5] Rebsdat S., Mayer D., "*Ethylene Glycol*", Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, (2005) Weinheim: Wiley-VCH.

[6] Hollis J.M., Lovas F.J., Jewell P.R., Coudert L.H., "*Interstellar Antifreeze: Ethylene Glycol*", The Astrophysical Journal, 571 (2002) 59–62.

[7] Mirkhani V., Tangestaninejad S., Yadollahib B., Alipanah L., "*Efficient regio- and stereoselective ring opening of epoxides with alcohols, acetic acid and water catalyzed by ammonium decatungstocerate(IV)*", Tetrahedron, 59 (2003) 8213–8218.

[8] Wang Z., Cui Y.-T., Xu Z.-B., Qu J., "*Hot Water-Promoted Ring-Opening of Epoxides and Aziridines by Water and Other Nucleopliles*", The Journal of Organic Chemistry, 73 (2008) 2270-2274.

[9] Fallah-Mehrjardi M., Kiasat A.R., Niknam K., "*Nucleophilic ring-opening of epoxides: trends in β-substituted alcohols synthesis*", Journal of Iranian Chemical Society, (2018) 1-49.

[10] Tahriri M., Yousefi M., Tabatabaee M., Mehrani K., Dehghani Ashkezari M., Dusek M., "*Crystal structure of N'-(2-hydroxy-3-methoxy benzylidene)-4-nitro benzenesulfonylhydrazide and 1,2-bis(2-hydroxy-3-methoxy-benzylidenehydrazine) as a co-crystalline compound*" Iranian Journal of Crystallography and Mineralogy, 26 (2018) 245-250.

[11] Soleimannejad J., Sedghiniya S., Nasibipour M., "*Synthesis -tetramethyl benzidinium)',5,5'and crystal structure of bis(3,3 bis(pyridine-2,6-dicarboxylato) nickelate(II) monohydrate*" Iranian Journal of Crystallography and Mineralogy, 25 (2017) 673-678.

[12] Amani A., Derikvand Z., Azadbakht A., Notash B., "*Synthesis, characterization and crystal structure of a co-crystal compound including 4,4'-bipyridine, 3-nithrophthalic acid*" Iranian Journal of Crystallography and Mineralogy, 25 (2017) 207-212.

[13] Tadjarodi A., Najjari S., Notash B., "*Synthesis and crystal structure of a new thiosemicarbzone, acenaphthenequinone thiosemicarbazone mono methanol*", Iranian Journal of Crystallography and Mineralogy, 22 (2015) 109-114.

[14] Soleimannejad J., Hooshmand S., Aghabozorg H., Ghadermazi M., Attar-Gharamaleki J., "*Crystal Structure of a Cd(II) Polymeric Complex Obtained from a Proton- Transfer Compound Containing Piperazine and Oxalic Acid*", Iranian Journal of

[DOR: 20.1001.1.17263689.1398.27.4.14.3]
[DOI: 10.29252/ijcm.27.4.959]

[21] Sheldrick G.M., *"Crystal structure refinement with SHELXL"* Acta Cryst., C71 (2015) 3–8.

[22] Brandenburg K., Putz H., "*Diamond (Version 3.2d), Crystal and Molecular Structure Visualization, Crystal Impact*", (2009) Bonn, Germany.

[23] Mirzaei M., Eshtiagh-Hosseini H., Karrabi Z., Molčanov K., Eydizadeh E., Mague J.T., Bauzád A., Frontera A., "*Crystal engineering with coordination compounds of Ni^{II}, Co^{II}, and Cr^{III} bearing dipicolinic acid driven by the nature of the noncovalent interactions*" CrystEngComm, 16 (2014) 5352–5363.

[24] Eshtiagh-Hosseini H., Mirzaei M., Zarghami S., Bauzád A., Frontera A., Mague J.T., Habibi M., Shamsipur M., "*Crystal engineering with coordination compounds of 2,6-dicarboxy-4-hydroxypyridine and 9-aminoacridine fragments driven by different nature of the face-to-face π···π stacking*" CrystEngComm, 16 (2014) 1359–1377.

[25] Eshtiagh-Hosseini H., Mirzaei M., Biabani M., Lippolis V., Chahkandi M., Bazzicalupi C., "*Insight into the connecting roles of interaction synthons and water clusters within different transition metal coordination compounds of pyridine-2,5-dicarboxylic acid: experimental and theoretical studies*" CrystEngComm, 15 (2013) 6752–6768.

Crystallography and Mineralogy, 16 (2009) 640-645.

[15] Dehno Khalaji A., Fejfarova K., Dusek M., "*Synthesis and crystal structure of Schiff-base compound (E)-4-methoxy-N-(4-hydroxybenzylidene) aniline*" Iranian Journal of Crystallography and Mineralogy, 21 (2013) 5-10.

[16] Soleimannejad J., Nazarnia E., "*A coordination polymer of Mn (III) with pyridine-2, 3-dicarboxylic acid and 4,4-bipyridine*" Iranian Journal of Crystallography and Mineralogy, 21 (2013) 59-68.

[17] Dehno Khalaji A., Fejfarova K., Dusek M., "*Synthesis and crystal structure of mercury (II) complex* $Hg(Meca_2en)I_2$" Iranian Journal of Crystallography and Mineralogy, 22 (2014) 7-12.

[18] Vladilo G., Hassanali A., "*Hydrogen Bonds and Life in the Universe*" Life, 8 (2018) 1-22.

[19] Jeffrey G.A., "*The role of the hydrogen bond and water in biological processes*" Journal of Molecular Structure, 322 (1994) 21-25.

[20] Bikas R., Aleshkevych P., Hosseini-Monfared H., Sanchiz J., Szymczak Lis T., "*Synthesis, structure, magnetic properties and EPR spectroscopy of a copper(II) coordination polymer with a ditopic hydrazone ligand and acetate bridges*" Dalton Transactions, 44 (2015) 1782–1789.

[DOR: 20.1001.1.17263689.1398.27.4.14.3]

[DOI: 10.29252/ijcm.27.4.959]